Leereenheid 1: de fijnstructuur van atomen

Het atoommodel van Sommerfeld en Oestrat.

- ✓ Elk elektron in een atoom bevindt zich in een magnetisch niveau.
- ✓ Elk magnetisch niveau kan maximaal twee elektronen bevatten. Deze hebben dan een tegengestelde spin, voorgesteld door ↑↓.
- ✓ De elektronen in de verschillende magnetische niveaus van éénzelfde subniveau hebben (in gewone toestand) éénzelfde energie.
- ✓ Subniveaus zijn opsplitsingen van een hoofdschil. Binnen één hoofdschil hebben de elektronen in de verschillende subniveaus een verschillende energie.

De Broglie

- ✓ De orbitaal wordt omvangrijker naarmate het schilnummer van het elektron groter is
- ✓ De s-orbitalen hebben een **bolvorm** met de atoomkern als middelpunt. Deze orbitalen zijn dus bolsymmetrisch: de trefkans voor de aanwezige elektronen (op een bepaalde afstand van de kern) is in alle richtingen even groot.
- ✓ De p-orbitalen vertonen een zogenaamde **haltervorm**, waarvan het knooppunt samenvalt met de atoomkern. Het trefkansgebied is dus niet bolsymmetrisch.
  De drie mogelijke p-orbitalen van eenzelfde subniveau oriënteren zich in de ruimte volgens drie loodrecht op elkaar staande richtingen (p_x, p_y en p_z).
- ✓ De d- en f-orbitalen vertonen nogal **ingewikkelde vormen**.

Het oxidatiegetal

- ✓ Het oxidatiegetal van een gebonden atoom kokmt overeen met de grootte van de lading die (reëel of denkbeeldig) door dit atoom gedragen wordt.

Algemene regels voor de elektronenconfiguratie

- ✓ **Opbouwprincipe:**
  Alle atomen beantwoorden aan het zelfde bouwpatroon
- ✓ **Regel van de minimale energie:**
  Opvulling van de subniveaus volgens toenemende energie, de volgorde verloopt volgens de diagonaalregel
- ✓ **Regel van Hund**:
  Een maximum aantal ongepaarde elektronen per subniveau
- ✓ **Regel van Pauli:**
  Elk elektron onderscheidt zich van elk ander elektron van het beschouwde atoom door ten minste één van de vier karakteristieken:
  1. Hoofdschil
  2. Subniveau
  3. Magnetisch niveau
  4. Spin
- ✓ **Stabiliteitsregels (volgens afnemend belang):**
  - Een edelgasstructuur
  - Een volzet subniveau
  - Een halfbezet subniveau

2. De fijnstructuur van moleculen

Het bereiken van een meer stabiele elektronenconfiguratie door de bindingspartners gaat dus gepaard met een evolutie naar:

- ✓ een lagere energie-inhoud
- ✓ een welbepaalde onderlinge afstand (bindingslengte)

Als Δ EN < 1,6 → Atoombinding
Als Δ EN > 1,6 → Ionbinding

De coaxiale overlapping
De coaxiale overlapping, dus de σ-binding, is gekenmerkt door

- ✓ Een overlappingszone met grote elektronendichtheid gesitueerd tussen de beide atoomkernen
- ✓ Rotatiemogelijkheid rond de as die de beide kernen verbindt

Parallelle overlapping
De parallelle overlapping tussen twee p-orbitalen, π-binding genoemd is gekenmerkt door

- ✓ Twee overlappingszones met een kleinere elektronendichtheid dan bij een σ-binding, gesitueerd onder en boven (en evenwijdig met) de as tussen beide kernen
- ✓ Het ontbreken van een rotatiemogelijkheid rond de as die beide kernen verbindt.

Donor-acceptorbindingen
De donor-acceptorbindingen worden in een Lewisformule:

- ✓ Voorgesteld door een pijltje van het donoratoom naar het acceptoratoom
- ✓ Aangevuld met formele ladingen. Hiermee geeft men aan dat, vergeleken met het normale aantal valentie-elektronen, het donoratoom nu minder en het acceptoratoom meer elektronen lijken te bezitten.

Bindingsrichtingen
De ruimtelijke schikking van de bindingspartners rond een centraal atoom kun je eenvoudig afleiden uit het sterisch getal (SG) van dit atoom.
Het sterisch getal van een centraal atoom is gelijk aan de som van

- ✓ Het aantal bindingspartners (dit is het aantal σ-bindingen)
- ✓ Het aantal resterende vrije elektronenparen van het atoom.

Het sterisch getal geeft dus het aantal orbitalen die ruimtelijk geschikt worden op de atoomromp van een centraal atoom. Je mag steeds veronderstellen dat deze (hybride-) orbitalen, door hun onderlinge afstoting, ruimtelijke posities zullen innemen die maximaal uit elkaar liggen.

Van der Waalskrachten (tussen apolaire moleculen)
Dit zijn doorgaans zwakke intermoleculaire krachten.

- ✓ Ze zijn werkzaam tussen alle soorten deeltjes.
- ✓ Ze zijn het gevolg van tijdelijke schommelingen in de ladingswolken van de deeltjes. Tijdens het naderen ontstaan door wederzijdse beïnvloeding geïnduceerde dipolen in de moleculen, dit wil zeggen tijdelijke negatieve en positieve ladingscentra. Hierdoor kun je de aantrekking tussen deze moleculen verklaren.

Dipoolkrachten (tussen dipoolmoleculen)
In de zogenaamde dipoolmoleculen treffen we permanent twee gelokaliseerde tegengesteld geladen centra aan. In deze moleculen vallen de gemiddelde ladingsmiddelpunten van alle positieve en negatieve deelladingen dus niet samen.

Opdat een molecule een dipoolkarakter bezit moet aan de volgende voorwaarden voldaan worden:

- ✓ Aanwezigheid van één of meer gepolariseerde atoombindingen (te wijten aan een verschil in EN-waarden tussen de bindingspartners of donor-acceptorbindingen);
- ✓ Asymmetrische ruimtelijke posities van de (gelijksoortige) bindingspartners, zodat de gemiddelde negatieve en positieve ladingcentra niet samenvallen.

Waterstofbrugkrachten
Waterstofbrugkrachten treden op tussen moleculen waarin tenminste één H-atoom gebonden is aan één van de volgende elementen: F, O en N (kleine atomen, zeer grote EN-waarde). Het sterk gepositiveerde H-atoom moet bovendien een geringe grootte (omdat het enige elektron weggezogen wordt) oefent een grote aantrekkingskracht muit op het meer negatief geladen atoom (F, O, N) van een nabij gelegen molecule. De H-atomen vormen een “brug” tussen buurmoleculen, vandaar de benaming waterstofbrugkrachten.

Ion-dipoolkrachten

Dit is een binding tussen een ion en een dipool. Een voorbeeld hiervan is het hydroniumion. H_3O.